

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΧΗΜΕΙΑΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	6210	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	6 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΕΝΩΣΕΩΝ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ	
	4	6	
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΗΣ ΠΕΡΙΟΧΗΣ, ΕΙΔΙΚΟΥ ΥΠΟΒΑΘΡΟΥ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΩΝ		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	ΚΑΝΕΝΑ		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΗ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ, ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ΠΟΥ ΟΜΙΛΟΥΝ ΤΗΝ ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΓΛΩΣΣΑ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://eclass.uoa.gr/courses/CHEM208/		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

Το μάθημα διαπραγματεύεται:

- Τη συσχέτιση του Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού με άλλες φασματοσκοπικές μεθόδους απορρόφησης.
- Τις βασικές αρχές της φασματοσκοπίας Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού και τις παράμετρους που τη διέπουν (χημική μετατόπιση, σταθερά σύζευξης, βαθμίδας, NOE)
- Επίλυση φασμάτων μίας και δύο διαστάσεων
- Ανίχνευση διαμορφωτικών χαρακτηριστικών από τα φάσματα δύο διαστάσεων λαμβάνοντας υπόψη τα NOE.
- Εύρεση πιθανών βιοδραστικών διαμορφώσεων σε μόρια φαρμακολογικής σημασίας.
- Στρατηγική ταυτοποίησης οργανικών μορίων και βιομορίων.
- Εισαγωγή στη Δυναμική Ανταλλαγής.
- Οι έννοιες της Χημικής και Μαγνητικής Ισοδυναμίας.
- Ταυτομέρεια οργανικών ενώσεων.
- Εφαρμογή μεθόδων NMR για τον ορθολογικό σχεδιασμό φαρμακευτικών μορίων.
- NMR στερεής κατάστασης
- Μελέτη οργανικών αντιδράσεων με φασματοσκοπία Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού.
- Σχεδιασμό τριδιάστατων μορίων.
- Εφαρμογή ελαχιστοποίησης μορίων και Μοριακής Δυναμικής *in silico*
- Υπολογισμός κατιόντων μίας οργανικής αντίδρασης με DFT κβαντομηχανικούς υπολογισμούς.
Με την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος ο φοιτητής/φοιτήτρια αναμένεται:
- Να εφαρμόζει στρατηγικές ταυτοποίησης οργανικών ενώσεων και βιομορίων..
- Να αναγνωρίζει τα διαμορφωτικά χαρακτηριστικά μίας πιθανά βιοδραστικής ένωσης.
- Να σχεδιάζει και να υπολογίζει την ενέργεια και να ελαχιστοποιεί την ενέργεια ενός μορίου *in silico*.
- Να εφαρμόζει *in silico* Μοριακή Δυναμική.
- Να υπολογίζει κβαντομηχανικά καρβοκατιόντα που εμπλέκονται σε οργανικές αντιδράσεις.

Γνώσεις

- Γνώση χειρισμού πινάκων για την εύρεση της χημικής μετατόπισης πρωτονίων και ανθράκων σε οργανικές ενώσεις και βιομόρια.
- Γνώση αποτυπωμάτων σχάσης και χρήσης αυτών των αποτυπωμάτων για την ανίχνευση διαμορφωτικών στοιχείων μίας οργανικής ένωσης ή ενός βιομορίου.
- Γνώση της διαμορφωτικής πληροφορίας που προσφέρει το NOE.
- Γνώση των σύγχρονων ομοπυρηνικών και ετεροπυρηνικών 2D πειραμάτων.
- Γνώση των αρχών που διέπουν τους υπολογισμούς με χρήση μοριακής μηχανικής και κβαντοχημείας.
- Γνώση εφαρμογών μοριακής πρόσδεσης και μοριακής δυναμικής στη φαρμακοχημεία.

Δεξιότητες

- Ταυτοποίηση απλών οργανικών μορίων και βιομορίων.
 - Εφαρμογή στρατηγικής ταυτοποίησης με δεδομένη χρήση ομοπυρηνικών και ετεροπυρηνικών μορίων άγνωστης οργανικής ένωσης ή βιομορίου.
 - Πρόβλεψη μοριακής πρόσδεσης άγνωστων οργανικών δυνάμει βιοδραστικών μορίων.
 - Πρόβλεψη πιθανών βιοδραστικών διαμορφώσεων με μοριακή δυναμική.
- ### Ικανότητες
- Χρήση υπολογιστών για τον υπολογισμό *in silico* της ενέργειας και ελαχιστοποίησης ενέργειας ενός μορίου.
 - Χρήση υπολογιστών για τον υπολογισμό κβαντομηχανικά της ενέργειας ενός καρβοκατιόντος.
 - Χρήση υπολογιστών για την εφαρμογή απλής Μοριακής Δυναμικής
 - Χειρισμό μορίων (μεγέθυνση, υπολογισμός τυπικού φορτίου κλπ)

Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα.:

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Λήψη αποφάσεων

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας

και ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

.....

Άλλες...

.....

- Οι γενικές ικανότητες που θα πρέπει να έχει αποκτήσει ο φοιτητής/φοιτήτρια και στις οποίες αποσκοπεί το μάθημα είναι:
- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών.
- Αυτόνομη εργασία.
- Ομαδική εργασία.

- Ικανότητα εφαρμογής γνώσεων στην επίλυση προβλημάτων.
- Λήψη αποφάσεων.
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης
- Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών.

Σημείωση: Η υφή του μαθήματος είναι κυρίως πρακτική και οι φοιτητές/φοιτήτριες επιλύουν διάφορα προβλήματα στην τάξη. Ενθαρρύνονται να αποκτήσουν αυτονομία στην ταυτοποίηση οργανικών μορίων και κατανόηση των διαμορφωτικών τους στοιχείων. Τα δεδομένα αυτά συνδέονται με την εφαρμογή τους που έχουν στη φαρμακευτική χημεία. Μαθαίνουν δηλαδή ότι όλη αυτή η γνώση είναι χρήσιμη στον ορθολογικό σχεδιασμό φαρμακευτικών μορίων. Επίσης ενθαρρύνονται στην τάξη να δημιουργήσουν ομάδες για την επίλυση των προβλημάτων που τίθενται.

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

- Φασματοσκοπία Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού. Ταυτοποίηση οργανικών μορίων και βιομορίων με χρήση τεχνικών μίας και δύο διαστάσεων υγρής κατάστασης. Εφαρμογές φασματοσκοπίας Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού στον ορθολογικό σχεδιασμό καινοτόμων φαρμακευτικών μορίων. Αρχές Φασματοσκοπίας NMR στερεάς κατάστασης. Η χρήση άλλων φασματοσκοπιών (IR, UV, CD, Raman, κρυσταλλογραφίας ακτίνων-X και MS) στην ταυτοποίηση οργανικών ενώσεων και βιομορίων. Παραδείγματα εφαρμογών των φασματοσκοπιών όπου αποδεικνύεται η συμπληρωματικότητά τους στην ταυτοποίηση οργανικών ενώσεων και βιομορίων. Εφαρμογές Μοριακής Μοντελοποίησης στη διαμορφωτική ανάλυση και μοριακή πρόσδεση βιοδραστικών μορίων
- Εξερεύνηση υπολογιστικών πακέτων μοριακής μοντελοποίησης

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</p>	<p>Πρόσωπο με πρόσωπο.</p>
<p>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην</p>	<p>Στη Διδασκαλία:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Παρουσιάσεις με πολυμεσικό περιεχόμενο

<p>Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</p>	<p>(εικόνες, animation).</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Συμπλήρωση ερωτηματολογίων. ▪ Εξάσκηση σε υπολογιστές (ΣΣΑΤΕΣ) <p>Στην Επικοινωνία με τους φοιτητές:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Υποστήριξη της μαθησιακής διαδικασίας μέσω της ηλεκτρονικής πλατφόρμας e-Class (ανακοινώσεις, πληροφορίες, μηνύματα, έγγραφα, ομάδες χρηστών, κ.λπ.). <p>Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο</p>											
<p>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</p> <p>Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.</p> <p>Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.</p> <p>Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="625 709 951 772">Δραστηριότητα</th> <th data-bbox="951 709 1279 772">Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="625 772 951 814">Διαλέξεις</td> <td data-bbox="951 772 1279 814">40</td> </tr> <tr> <td data-bbox="625 814 951 890">Εργαστηριακές Ασκήσεις</td> <td data-bbox="951 814 1279 890">12</td> </tr> <tr> <td data-bbox="625 890 951 966">Ατομική μελέτη προετοιμασία</td> <td data-bbox="951 890 1279 966">40</td> </tr> <tr> <td data-bbox="625 966 951 1008">Σύνολο Μαθήματος</td> <td data-bbox="951 966 1279 1008">92</td> </tr> </tbody> </table>		Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου	Διαλέξεις	40	Εργαστηριακές Ασκήσεις	12	Ατομική μελέτη προετοιμασία	40	Σύνολο Μαθήματος	92
Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου											
Διαλέξεις	40											
Εργαστηριακές Ασκήσεις	12											
Ατομική μελέτη προετοιμασία	40											
Σύνολο Μαθήματος	92											
<p>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ</p> <p>Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</p> <p>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες</p> <p>Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.</p>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Οι φοιτητές αξιολογούνται με διάφορα πεντάλεπτα quiz (8-10). Τα quiz αποτελούνται από ερωτήσεις σωστού/λάθους, πολλαπλής επιλογής και σύντομης απάντησης. ▪ Επίσης, η πρόοδος των φοιτητών αξιολογείται με δύο προόδους. Φοιτητές και φοιτήτριες οι οποίοι/ες έχουν προβιβάσιμο βαθμό από το άθροισμα των quiz+προόδων απαλλάσσονται στις τελικές εξετάσεις του εξαμήνου. ▪ http://eclass.uoa.gr/courses/CHEM208/ 											

--	--

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

-Προτεινόμενη Βιβλιογραφία : (1) Θ. Μαυρομούστακος, Ι. Ματσούκας: «NMR. Αρχές και Εφαρμογές Φασματοσκοπίας Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού στην Ιατρική, Φαρμακευτική Χημεία, Βιοχημεία και Χημεία Τροφίμων και Ποτών. ISBN 96088751-5-3, Αθήνα 2006. Εύδοξος 572, Εκδότης Ι. Β. Παρισιάνος. (2) Θ. Μαυρομούστακος, Π. Ζουμπουλάκης: «Μοριακή Μοντελοποίηση. Εφαρμογές Στην Οργανική και Φαρμακευτική Χημεία» ISBN 978-960-89486-5-5, Αθήνα 2008. Εύδοξος 580, Εκδότης Ι. Β. Παρισιάνος. (3) Θ. Μαυρομούστακος, NMR στερεής κατάστασης. ISBN 96086193-1-9, Αθήνα 2001.

-Συναφή επιστημονικά περιοδικά: J. Medicinal Chemistry, J. Mol. Graph. Mod. J. Chem. Inf. Mod.